

Махмуд К.А., Таишыков О.Л

МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАДИАЦИОННО-ЗАЩИТНОЙ СПОСОБНОСТИ ВОЛЬФРАМАТНЫХ КОМПОЗИТОВ ЛИТИЯ

Аннотация. Выполнена оценка параметров экранирования гамма-излучения для некоторых композитов, содержащих различные соотношения вольфрамата лития Li_2WO_4 , с использованием расчетного кода MCNP-5. Массовый коэффициент ослабления и слой половинного ослабления были рассчитаны на основе имитированной средней длины трека, полученной с помощью высокопрецизионного расчетного кода. Кроме того, для расчета фактора накопления фотонного излучения для энергии гамма-излучения, изменяющейся от 0,015 до 15 МэВ использовалась программа Phy-X. нейтронов.

Ключевые слова: вольфраматных композитов, радиационно-защитной, Массовый коэффициент ослабления, MCNP-5 Код

Abstract. Monte Carlo simulation code (MCNP-5) was applied to evaluate the gamma ray shielding parameters for some composites containing different ratios of lithium tungstate Li_2WO_4 . The mass attenuation coefficient (MAC) and the half value layer (HVL) were calculated based on the simulated average track length obtained by Monte Carlo simulation code. Furthermore, the program Phy-X was used to calculate the buildup factor (EBF) in gamma ray energy varied between 0.015 and 15 MeV. The obtained results showed that insertion of Li_2WO_4 enhance the shielding features of the studied composites

Key words: Lithium Tungstate Composites, radiation shielding, mass attenuation coefficient, MCNP-5 code

Введение

В настоящее время, в связи с развитием ядерной медицины (лучевая терапия и методы радиационной визуализации) требуются эффективные экранирующие материалы для защиты от ионизирующего излучения. Большое внимание уделяется композитам, бетонам, стеклам, полимерам и природным минералам, которые могут быть использованы в качестве защитных материалов от ионизирующего излучения [1–6].

Соединения лития используются в производстве стекла благодаря их полезным свойствам, таким как низкий коэффициент теплового расширения, долговечность, однородность цвета и снижение скорости коррозии, в то время как вольфрам считается одним из лучших материалов, которые используются для ослабления ионизирующего излучения (гамма- и рентгеновского излучения) [7]. Наше внимание уделяется этим элементам из-за их полезных свойств. Предыдущие работы изучали тепловые и электрические свойства вольфрамата

лития Li_2WO_4 [8], но никто не оценивал экранирующие свойства Li_2WO_4 .

Настоящая работа направлена на оценку экранирующей способности литий-вольфрамовых композитов по отношению к ионизирующему излучению с использованием расчетного кода MCNP-5, реализующего метод Монте-Карло, в дополнение к недавно созданной программе под названием Phy-X. Длина трека была смоделирована для некоторых источников гамма-излучения с энергиями, варьирующимися от 0,05 до 1,4 МэВ. После этого оцененная длина дорожки использовалась для расчета параметров экранирования излучения, таких как массовый коэффициент ослабления μ_m (MAC – mass attenuation coefficient), слой половинного ослабления $\Delta_{0,5}$. Кроме того, программа Phy-X использовалась для расчета фактора накопления фотонного излучения (EBF – exposure buildup factor) исследуемых композитов в диапазоне энергий от 0,015 до 15 МэВ.

Материалы и методы

Для достижения основной цели работы входной файл MCNP требовал точной информации о геометрии, источнике (карта SDEF) и составе (карта материала) для выполнения моделирования MCNP. Геометрия моделирования была разработана в соответствии с трехмерной установкой (рис. 1).

Радиоактивный источник был помещен в свинцовый коллиматор с диаметром щели 2 см. Источник располагался на расстоянии 10 см от детектора. Моделирование происходило в предположении, что подготовленные образцы имеют форму диска диаметром 2 см, расположенные между источником и детектором на расстоянии 5 см от источника. Химический состав и плотность исследованных композитов представлены в табл. 1. Детектор был настроен на счет F4 для оценки длины трека падающего гамма-излучения. Относительная ошибка, оцененная из моделирования MCNP, составляет менее 1% [9–11].

Массовый коэффициент ослабления (MAC) используется для оценки способности исследуемых композитов ослаблять падающее гамма-излучение. Кроме того, массовый коэффициент ослабления, моделируемый с помощью расчетного кода MCNP, рассчитывается теоретически с использованием программы Phy-x. Массовый коэффициент ослабления для композита, состоящего из n элементов, может быть вычислен согласно уравнению (1) [1].

$$(\text{MAC})_{\text{composite}} = \sum_i^n \omega_i \cdot (\mu_m)_i \quad (1)$$

где ω_i и $(\mu_m)_i$ относятся к MAC изученных композитов, массовой доле элементов, массового коэффициента ослабления для i -го составляющего элемента.

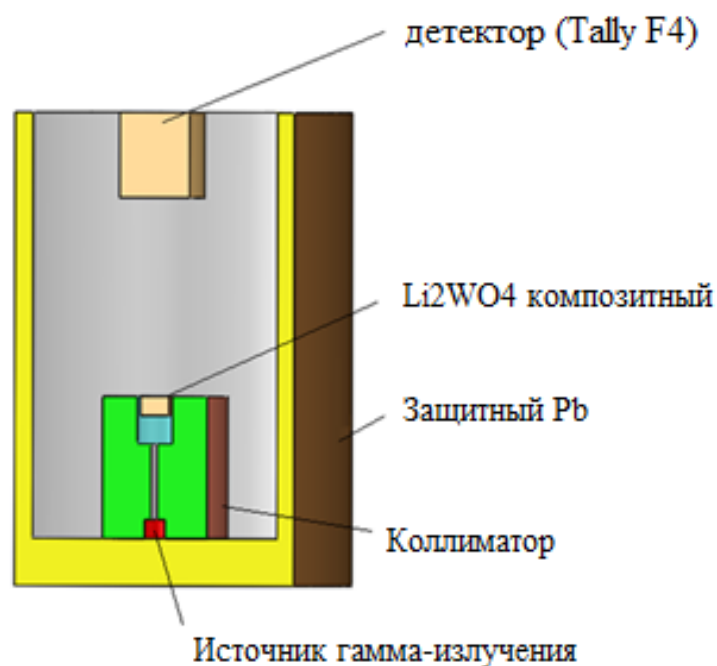


Рисунок 1 – Геометрия, используемая для процесса моделирования

Слой половинного ослабления ($\Delta_{0,5}$) используется для определения толщины экранирующего материала, который может снизить интенсивность излучения до половины его первоначального значения, и рассчитывается в соответствии с уравнением (2).

$$\Delta_{0,5} = \frac{\ln(2)}{\mu \text{ (см}^{-1}\text{)}}, \quad (2)$$

где μ – линейный коэффициент ослабления.

Кроме того, фактор накопления фотонного излучения (EBF) рассчитывали с использованием программы Phy-x в диапазоне энергий от 0,015 до 15 МэВ [12].

Таблица 1 – Химический состав и плотность исследуемых композитов

Образец	Плотность (г/см ³)	Химический состав (wt %)					
		Co	C	H	O	Li	W
W1	1,267	0,027	56,995	4,447	35,112	0,240	3,178
W2	1,293	0,026	54,527	4,255	34,651	0,459	6,082
W3	1,304	0,025	52,265	4,078	34,228	0,660	8,744
W4	1,326	0,024	50,183	3,916	33,838	0,845	11,194

Результаты и обсуждение

Характеристики экранирования гамма-излучения были смоделированы для четырех исследуемых композитов в диапазоне энергий от 0,0595 до 1,408 МэВ. Кроме того, МАС и другие экранирующие свойства рассчитаны теоретически с использованием программы Phy-x. На рисунке 2 показано сравнение значений МАС, смоделированных с использованием кода MCNP и рассчитанных теоретически с использованием программы Phy-x. Видно, что моделируемые и рассчитанные значения близки друг к другу, что подтверждает достоверность процессов моделирования.

Значения МАС (см. рис. 2) достигают максимума при низкой энергии гамма-фотонов (0,0595 МэВ) и варьируются между 0,301 и 0,580 ($\text{см}^2 \cdot \text{г}^{-1}$) для композитов W1 и W4, соответственно. Дальнейшее увеличение энергии падающего гамма-излучения приводит к быстрому снижению МАС из-за фотоэлектрического взаимодействия, у которого поперечное сечение взаимодействия пропорционально $E^{-3.5}$ [13].

Затем вблизи энергии гамма-излучения 0,0695 было обнаружено увеличение значений МАС. Это увеличение связано с поглощением рентгеновских лучей K-электроном вольфрама. Выше 0,3 МэВ наблюдалось постепенное уменьшение значений МАС с увеличением энергии падающего гамма-излучения. Это уменьшение связано с комптоновским рассеиванием, имеющим сечение, пропорциональное E^{-1} [14]. Более низкие значения МАС достигаются при высокой энергии (для 1,408 МэВ). Согласно результатам моделирования для энергии гамма-излучения от 0,0595 до 1,408 МэВ самый высокий МАС, изменяющийся в диапазоне от 0,0565 до 0,580 $\text{см}^2 \cdot \text{г}^{-1}$, получен для композита W4 (содержание Li_2WO_4 20 мас.%). Самый низкий μ_m , изменяющийся в диапазоне от 0,0556 до 0,301 $\text{см}^2 \cdot \text{г}^{-1}$, получен для композита W1 (содержание Li_2WO_4 5 мас.%).

Слой с половинного ослабления $\Delta_{0,5}$ (см) для исследуемых композитов является параметром экранирования, который определяет толщину материала, необходимую для снижения интенсивности падающего гамма-излучения до половины его первоначального значения. На рисунке 3 показано сравнение между смоделированными и рассчитанными значениями $\Delta_{0,5}$. Из графика следует, что значение $\Delta_{0,5}$ зависит от энергии падающего гамма-излучения. $\Delta_{0,5}$ уменьшается при низкой энергии (для 0,0595 МэВ) и варьируется между 0,892 и 1,777 для композитов W4 и W1 соответственно. После этого значения $\Delta_{0,5}$ для всех исследованных композитов быстро возрастают с увеличением энергии падающих гамма-фотонов из-за фотоэлектрического взаимодействия [15].

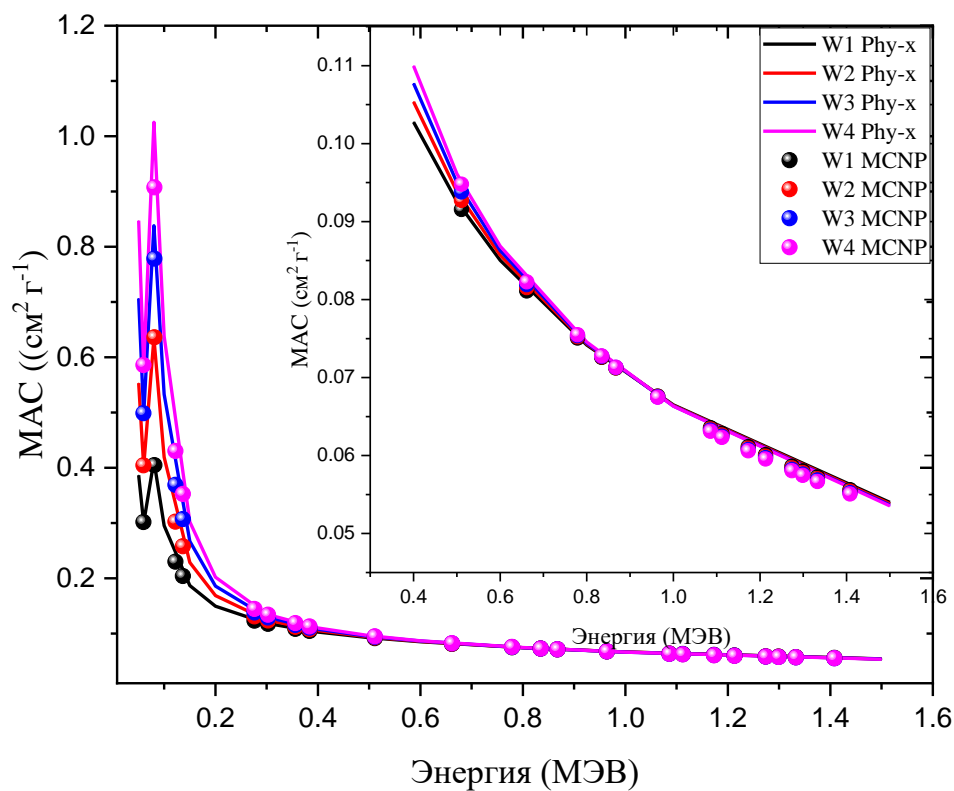


Рисунок 2 – Сравнение моделируемого и расчетного массовый коэффициент ослабления

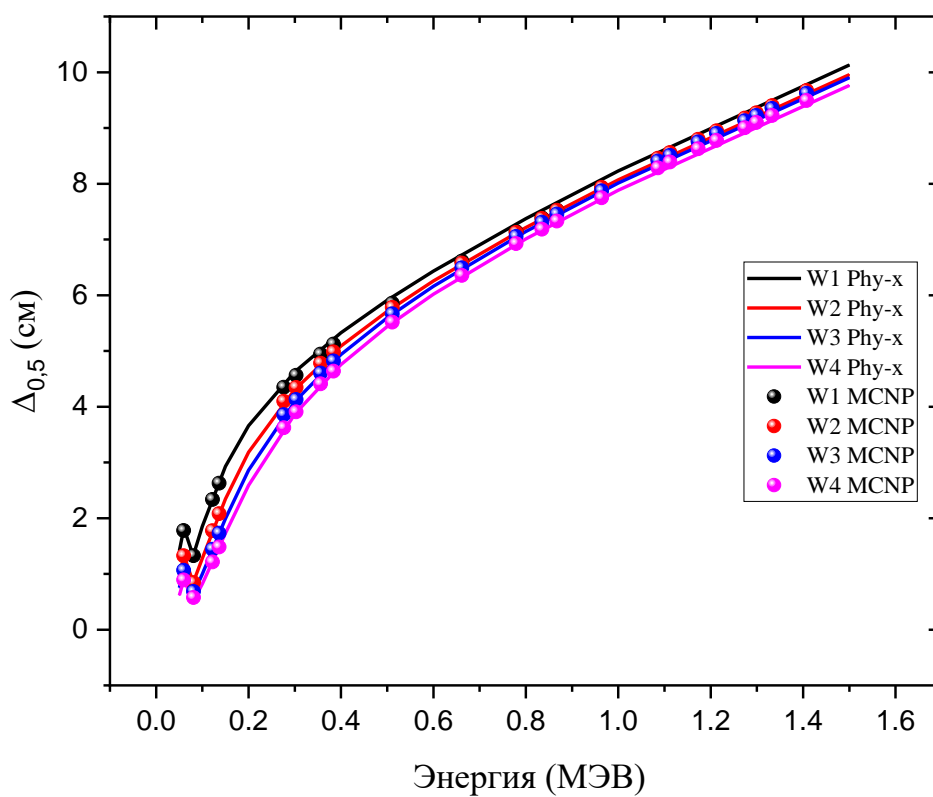


Рисунок 3 – Зависимость величины слоя половинного ослабления $\Delta_{0,5}$ от энергии падающего гамма-излучения для исследованных композитов

Дальнейшее увеличение энергии падающего гамма-излучения вызывает постепенное увеличение значений $\Delta_{0,5}$. Это постепенное увеличение связано с комптоновским взаимодействием. Согласно смоделированным данным в интервале энергий от 0,0595 до 1,408 МэВ, меньшие значения $\Delta_{0,5}$ получаются для композита W4 (содержание Li_2WO_4 – 20 мас.%) и варьируются от 0,892 до 9,492 см, в то время как наибольшие значения $\Delta_{0,5}$ достигаются для композита W1 (содержание Li_2WO_4 – 5 мас.%) и находятся в диапазоне от 1,777 до 9,636 см.

Фактор накопления фотонного излучения (EBF) для исследованных композитов рассчитывали с использованием программы Phy-x в диапазоне энергий от 0,015 до 15 МэВ. Изменение EBF для исследованных композитов в зависимости от энергии падающего гамма-излучения показано на рисунке 4. Из графика видно, что наименьшие значения EBF достигаются при низких и высоких энергиях из-за преобладания фотоэлектрического эффекта и эффекта образования пар. В результате этих взаимодействий предотвращается накопление фотонов в исследуемых композитах, и энергия падающего гамма-излучения полностью расходуется на выброс граничного электрона или создание электрон-позитронных пар. Значения EBF достигают максимума для промежуточных энергий, где комптоновское рассеяние является основным взаимодействием. Комптоновское рассеяние представляет собой процесс упругого столкновения, при котором часть энергии падающего гамма-кванта расходуется для выброса одного внешнего (наименее связанного) электрона рассеивающего атома, а гамма-квант отклоняется от своего пути.

Для всех исследованных композитов значения EBF постепенно возрастает с увеличением глубины проникновения, особенно для глубины проникновения, превышающей 20 mfp (mean free path – длина свободного пробега). Для всех исследованных образцов пик для EBF появляется при энергии гамма-кванта около 0,0905 МэВ (чуть ниже энергии связи *K*-электрона вольфрама). Этот пик связан со скачком μ_m , который называется *K*-краем, и составляет 20% исследованных образцов. На рисунке 4 видно, что самое высокое значение EBF достигается для композита W1 с самым низким содержанием Li_2WO_4 (5 мас.%). С увеличением содержания Li_2WO_4 в исследованных композитах значения EBF постепенно уменьшаются. Самые низкие значения EBF достигнуты для композитов W4 с содержанием Li_2WO_4 20 мас.%.

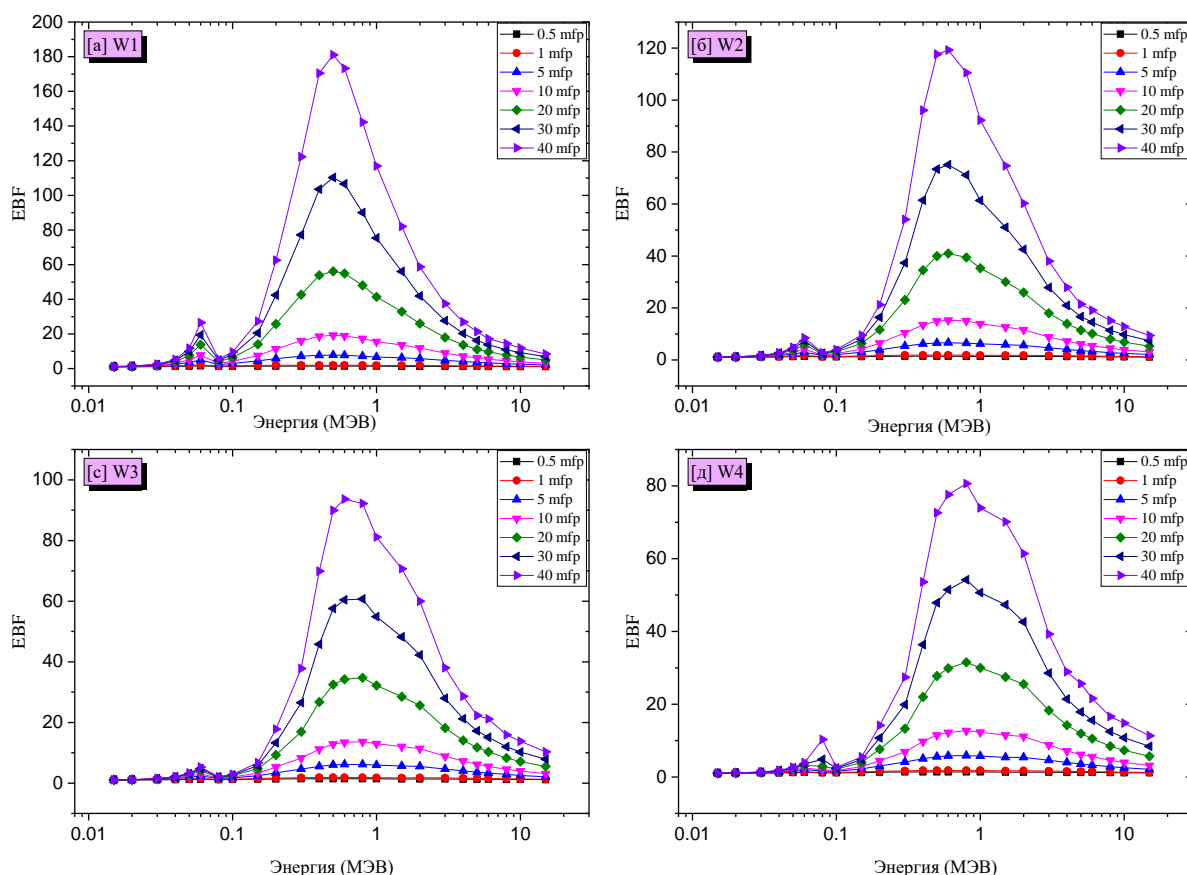


Рисунок 4 – Изменение фактора накопления фотонного излучения (EBF) в зависимости от энергии падающего гамма-излучения на некоторых фиксированных глубинах проникновения

Из данных, приведенных на рисунке 5, следует, что эффективное сечение выведения (Σ_R) быстрых нейтронов для исследованных композитов изменяется в диапазоне от 0,0642 до 0,0699 ($\text{см}^2 \cdot \text{г}^{-1}$). Наибольшее значение эффективного сечения выведения достигается для композита W1 ($\Sigma_R = 0,0699 \text{ см}^2 \cdot \text{г}^{-1}$), который имеет самое низкое содержание соединения Li_2WO_4 . Наименьшее эффективное сечение выведения достигается для композита W4 ($\Sigma_R = 0,0642 \text{ см}^2 \cdot \text{г}^{-1}$) с самым высоким содержанием Li_2WO_4 .

Таким образом, было обнаружено, что добавление Li_2WO_4 улучшает экранирующие свойства исследуемых композитов, такие как MAC, HVL и фактор накопления фотонного излучения.

Заключение

Расчетный код Монте-Карло MCNP-5 был применен для оценки параметров экранирования четырех композитов, содержащих различные соотношения Li_2WO_4 . Значения массовых коэффициентов ослабления,

полученные с использованием кода MCNP-5, сравнивались с рассчитанными с использованием программы Phy-x. Было обнаружено, что композит W4 имеет самые высокие значения массовых коэффициентов ослабления (от 0,055 до 0,585 $\text{см}^2 \cdot \text{г}^{-1}$), в то время как композит W1 имеет наименьшие значения μ_m , находящиеся в диапазоне от 0,0556 до 0,301 ($\text{см}^2 \cdot \text{г}^{-1}$). Эффективные сечения выведения быстрых нейтронов, определенные для исследованных композитов, находятся в диапазоне от 0,0642 ($\text{см}^2 \cdot \text{г}^{-1}$) для композита W4 до 0,0699 ($\text{см}^2 \cdot \text{г}^{-1}$) для композита W1.

Библиографический список

1. Investigation of radiation shielding properties for some building materials reinforced by basalt powder / K. A. Mahmoud, O. L. Tashlykov, A. F. El Wakil [et al.] // AIP Conference Proceedings. – 2019. – 2174 : Physics, technologies and innovation (PTI-2019) : Proceedings of the VI International Young Researchers' Conference. – P. 020036.
2. Mahmoud K. A. Comparative studies between the shielding parameters of concretes with different additive aggregates using MCNP-5 simulation code / K. A. Mahmoud, M. I. Sayyed, O. L. Tashlykov // Radiation Physics and Chemistry. – 2019. – Vol. 165. – P. 108426.
3. Aggregates grain size and press rate dependence of the shielding parameters for some concretes / O. L. Tashlykov, A. F. El Wakil, I. E. El Aassy, K. A. Mahmoud [et al.] // Progress in Nuclear Energy. – 2020. – Vol. 118. – P. 103092.
4. Investigation of the gamma ray shielding properties for polyvinyl chloride reinforced with chalcocite and hematite minerals / K. A. Mahmoud, E. Lacomme, M. Sayyed [et al.] // Heliyon. – 2020. – Vol. 6. – P. 03560.
5. Composition Optimization of Homogeneous Radiation-Protective Materials for Planned Irradiation Conditions / O. L. Tashlykov, S. Shcheklein, I. Russkikh [et al.] // Atomic Energy. – 2017. – Vol. 121, Is. 4. – P. 303–307.
6. Experimental and Theoretical Study of Organometallic Radiation-Protective Materials Adapted to Radiation Sources with a Complex Isotopic Composition / I. M. Russkikh, E. N. Seleznev, O. L. Tashlykov, S. E. Shcheklein // Physics of Atomic Nuclei. – 2015 – Vol. 78, Is. 12. – P. 1451–1456.
7. Sayyed M. I. Structural, thermal, optical features and shielding parameters investigations of optical glasses for gamma radiation shielding and defense applications / M. I. Sayyed, G. Lakshminarayana // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2018. – Vol. 487. – P. 53–59.
8. Yahaya A. H. Thermal, electrical and structural properties of Li_2WO_4 / A. H. Yahaya, Z. A. Ibrahim, A. K. Arof // Journal of alloys and compounds. – 1996. – Vol. 241. – P. 148–152.
9. Modified halloysite minerals for radiation shielding purposes / Asmaa Mansour, M. Sayyed, K. A. Mahmoud [et al.] // Journal of Radiation Research and Applied Sciences. – 2020. – Vol. 13. – P. 94–101.

10. Novel vanadyl lead-phosphate glasses: P_2O_5 – PbO – ZnO – Na_2O – V_2O_5 : Synthesis, optical, physical and gamma photon attenuation properties / Y. S. Rammah, K. A. Mahmoud, M. I. Sayyed [et al.] // *Journal of Non-Crystalline Solids*. – 2020. – Vol. 534. – URL: <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2020.119944> (accessed: 04.04.2020).
11. Study on the radiation attenuation properties of locally available bees-wax as a tissue equivalent bolus material in radiotherapy / S. Islam, K. A. Mahmoud, M. I. Sayyed [et al.] // *Radiation Physics and Chemistry*. – 2020. – Vol. 172. – P. 108559.
12. Sakar E. Phy-X / PSD: Development of a user friendly online software for calculation of parameters relevant to radiation shielding and dosimetry / E. Sakar // *Radiation Physics and Chemistry*. – 2020. – Vol. 166. – P. 108496
13. Mahmoud K. A. The role of cadmium oxides in the enhancement of radiation shielding capacities for alkali borate glasses / K. A. Mahmoud // *Ceramics International*. – 2020. – URL: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.02.219> (accessed: 04.04.2020).
14. El-Agawany F. I. Evaluation of nuclear radiation shielding competence for ternary Ge-Sb-S chalcogenide glasses / F. I. El-Agawany // *Applied Physics A*. – 2020. – Vol. 126. – P. 258.
15. Gamma ray shielding characteristics and exposure buildup factor for some natural rocks using MCNP-5 code / K. A. Mahmoud, M. I. Sayyed, O. L. Tashlykov // *Nuclear Engineering and Technology*. – 2019. – Vol. 51. – P. 1835–1841.